

ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI KINERJA *NANOCAGE* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ (AIN) UNTUK SISTEM PENGHANTAR OBAT (SPO) METIMAZOLA DENGAN METODE TEORI FUNGSIONAL KERAPATAN

Hipertiroidisme dapat terjadi karena jaringan terpapar hormon tiroid yang bersirkulasi dalam jumlah berlebihan. Pengobatan hipertiroidisme dapat dilakukan dengan cara terapi iodium radioaktif, pembedahan dan oral. Terapi iodium radioaktif dan pembedahan memiliki risiko yang sangat tinggi. Cara oral merupakan cara yang paling aman dalam proses pengobatannya, salah satunya dengan menggunakan obat metimazola. Namun masih memiliki efek samping bagi penderita. Untuk mengurangi efek samping ini, memerlukan sistem penghantar obat yang aman dan efisien. Sistem penghantar obat berbasis nanomaterial sedang banyak dikembangkan. *Nanocage* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ menjadi kandidat yang mumpuni karena memiliki struktur yang unik, stabilitas kimia yang tinggi, mekanisme kerja efisien, reaktivitas rendah dan kinerja adsorpsi tinggi tetapi memiliki celah pita yang cukup lebar sehingga perlu dilakukan peningkatan sifat optik dengan cara pendopanan. Pada studi ini dilakukan studi teoritis dengan metode teori fungsional kerapatan (DFT) pada level teori r2scan-3c. Penambahan dopan berupa logam Li, Na, Bi dan La serta mengasumsikan molekul dalam fasa gas dan pelarut air. Hasil penelitian menunjukkan bahwa penambahan dopan berhasil menurunkan lebar celah pita *nanocage* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ dan mengubah sifat elektronik yang ditunjukkan oleh grafik DOS dan spektrum uv-vis. Energi adsorpsi *nanocage* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ dan yang terdopan Li, Na, Bi, La pada fasa gas sebesar -293,4565; -198,5873; -158,0230; -338,8340 dan 331,3556 KJ/mol sementara pada fasa pelarut air sebesar -273,0759; -206,7563; -110,4013; -331,8889 dan 347,1059 KJ/mol. Analisis QTAIM menunjukkan bahwa interaksi *nanocage* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ dan *nanocage* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ terdopan dengan metimazola baik dalam fasa gas maupun fasa pelarut air memiliki interaksi kovalen parsial. Dengan kekuatan ikatan pada tingkat interaksi sedang. Dengan karakteristik yang ditunjukkan pada tiap analisis, yang berpotensi sebagai sistem penghantar obat (SPO) untuk obat metimazola ialah *nanocage* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ dan $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$ yang terdopan logam Li dan Bi.

Kata-kata kunci: adsorpsi; DFT; hipertiroidisme; metimazola; *nanocage* $\text{Al}_{12}\text{N}_{12}$.

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY OF THE PERFORMANCE OF $Al_{12}N_{12}$ (AIN) NANOCAGE FOR METHIMAZOLE DELIVERY DRUG SYSTEM (DDS) BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD

Hyperthyroidism can occur because tissues are exposed to excessive amounts of circulating thyroid hormone. Treatment of hyperthyroidism can be done by radioactive iodine therapy, surgery and orally. Radioactive iodine therapy and surgery have very high risks. The oral method is the safest way in the treatment process, one of which is by using the drug metimazole. However, it still has side effects for the patient. To reduce these side effects, a safe and efficient sistem penghantar obat is needed. Nanomaterial-based drug delivery system are being developed. $Al_{12}N_{12}$ nanocage is a qualified candidate because it has a unique structure, high chemical stability, efficient mechanism of action, low reactivity and high adsorption performance but has a wide band gap so it is necessary to improve the optical properties by doping. In this study, a theoretical study was carried out using the density functional theory (DFT) method at the r2scan-3c theory level. The addition of dopant in the form of Li, Na, Bi and La metals and assuming molecules in the gas phase and water solvent. The results showed that the addition of doping successfully decreased the band gap width of $Al_{12}N_{12}$ nanocage and changed the electronic properties shown by DOS graph and uv-vis spectrum. The adsorption energies of $Al_{12}N_{12}$ nanocage and doped Li, Na, Bi, La in the gas phase are -293.4565; -198.5873; -158.0230; -338.8340 and 331.3556 KJ/mol while in the water solvent phase are -273.0759; -206.7563; -110.4013; -331.8889 and 347.1059 KJ/mol. QTAIM analysis shows that the interaction of $Al_{12}N_{12}$ nanocage and $Al_{12}N_{12}$ nanocage doped with metimazole in both gas phase and water solvent phase has partial covalent interaction. With bond strength at moderate interaction level. With the characteristics shown in each analysis, the potential delivery drug system (DDS) for metimazole drug is $Al_{12}N_{12}$ nanocage and $Al_{12}N_{12}$ doped with Li and Bi metals.

Keywords: adsorption; DFT; hyperthyroidism; methimazole; $Al_{12}N_{12}$ nanocage.